

Title	準結晶上のfrustrateしたIsing spin系の示す磁性のMC法を用いた研究(2004年度後期基礎物理学研究所研究会「モンテカルロ法の新展開3」,研究会報告)
Author(s)	藤田, 早苗; 新関, 駒二郎
Citation	物性研究 (2005), 85(3): 406-409
Issue Date	2005-12-20
URL	http://hdl.handle.net/2433/110371
Right	
Type	Departmental Bulletin Paper
Textversion	publisher

準結晶上の frustrate した Ising spin 系の示す磁性の MC 法を用いた研究

東北大学 理学部 藤田 早苗¹、新関 駒二郎

準結晶の磁氣的性質をモンテカルロ法によって研究した。フラストレイションを持つ準結晶の場合についてスピングラス類似の振る舞いを観測した。

1 序

準結晶とはある種の金属合金が示す非周期的秩序構造である。準結晶の場合、系に含まれる任意の局所構造が有限密度で分布するのみならず、その分布における隣り合った局所構造の間の距離はその局所構造のサイズ程度となる。そのため、準結晶がどのような磁氣的性質を持つかは興味深い問題と言える¹⁾²⁾。ところが、沢山の磁性準結晶（局在モーメントを持つ準結晶）が実験的に調べられたにも拘わらず、強磁性などの磁氣的秩序を示すものは一つも見つかっていない。これらの磁性準結晶は低温において例外なくスピングラス的凍結現象を示す³⁾。局在モーメント間に働く RKKY 相互作用がその原因と考えられているが、それを裏付ける理論的研究は存在しない。そこで我々は、HBS タイリングと呼ばれる 2 次元準結晶上のイジングモデルの磁性を、モンテカルロシミュレーションによって調べた。RKKY 相互作用を念頭にして、強磁性相互作用と反強磁性相互作用が混在したモデルを採用した。また、手法としては焼鈍し法 (simulated annealing) やエントロピックサンプリング等を用いた。

2 モデル

HBS タイリング (図 1) と呼ばれる格子 (2 次元準結晶) を用いた。この格子の最近接サイト間ネットワークおよび次近接サイト間ネットワークをそれぞれ図 1、2 に示す。最近接サイト間ネットワークは bipartite なので、最近接サイト間相互作用は交換相互作用の符号に拘わらずフラストレイトしない。ところが次近接サイト間ネットワークは五角形を基調とした構造をしているために反強磁性的相互作用の場合には幾何学的フラストレイションが生じる。そこで、 $J_1 > 0$, $J_2 > 0$ として次式のようなハミルトニアンを採用した：

$$H = -J_1 \sum_{\langle i,j \rangle}^{n.n.} \sigma_i \sigma_j + J_2 \sum_{\langle k,l \rangle}^{n.n.n.} \sigma_k \sigma_l. \quad (1)$$

この系の振る舞いを支配するパラメタは J_2/J_1 である。特に、 $J_2/J_1 < 0.5$ となる領域では基底状態が強磁性的となることが簡単な考察によって示される。

¹E-mail: fujita@cmpt.phys.tohoku.ac.jp

境界の影響を除くため、“近似結晶”を用いて周期的境界条件を課した。“近似結晶”のサイト数はフィボナッチ数の2倍となるが、本研究では、 $N = 178, 466, 1220$ の3種のサイズの“近似結晶”を用いた。なお、周期的境界条件を反周期的境界条件により置き換えた場合のエネルギー変化を解析すると、長距離秩序のあるなしが判定できる。

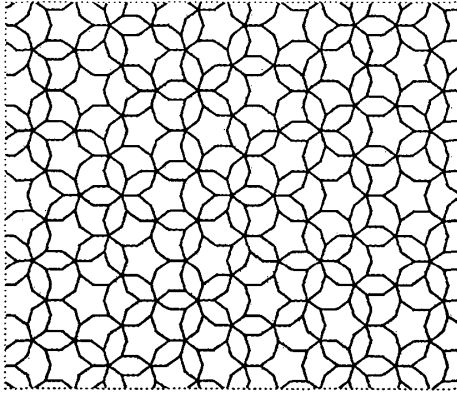


図 1: HBS タイリングの格子の最近接サイト間ネットワーク

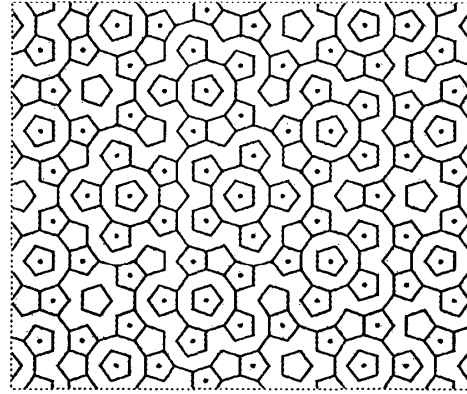


図 2: HBS タイリングの格子の次近接サイト間ネットワーク

3 方法

single-spin dynamics による焼鈍し法

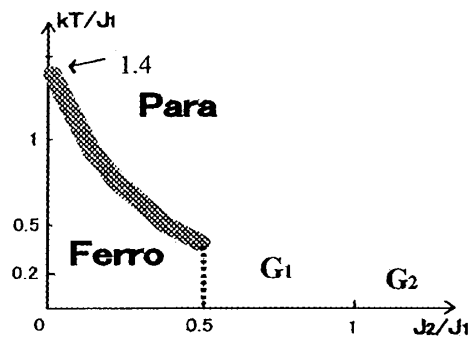
基底状態の探索には焼鈍し法を用いる。この方法は現実の物質に対する焼鈍し実験に対する模擬実験とも言える。スピンの凍結しているかどうかはエドワーズ・アンダーソンの q パラメータが 1 に近付いたかどうかで判別できる。計算量のサイズ依存性はパラメータ J_2/J_1 に関わらず $O(N)$ である。この方法を用いて、我々はエネルギー、磁化、比熱、帯磁率などの物理量を測定した。

Wang-Landau 法

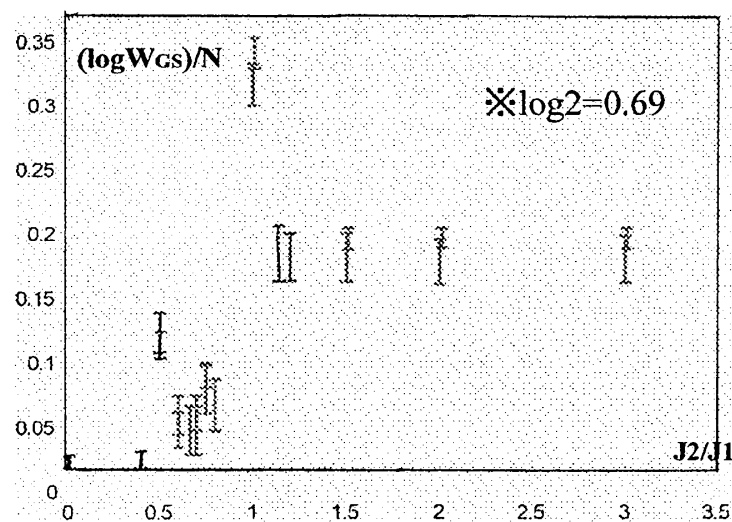
エントロピックサンプリング⁴⁾と言われる方法のうち、Wang らにより開発されたアルゴリズムである⁵⁾。この方法では状態密度をダイレクトに求めることができるが、2種の交換相互作用 J_1, J_2 が有理比の場合にのみ適用できる。同じ J_2/J_1 に対して計算量のサイズ依存性は $O(N^2)$ であるため、 $N = 1220$ の場合は殆ど計算していない。また、エネルギーバンド数が有理比 J_2/J_1 がに依存して変化するので、計算できる J_2/J_1 の値は計算機資源によって限られる。WL 法では、エネルギー、磁化、比熱、帯磁率、状態数などの物理量を測定した。

4 結果

おおまかな相図のスケッチとして図3を得た。強磁性的であるパラメタ領域 $J_2/J_1 < 0.5$ に対しては Binder パラメタによって相転移温度を見積もった。 $J_2/J_1 > 0.5$ ではスピンの低温で“凍結”することがエドワーズ・アンダーソンの q パラメータにより確認された。“凍結”する前に帯磁率や比熱が発散する傾向を示さないことから、この“凍結”は秩序化によるのではなくスピングラス的凍結であると結論した。

図 3: J_2/J_1 v.s. kT/J_1 の相図

基底状態（スピン配置）またはそれに近い状態は、焼鈍し法でも WL 法でも求めることができるが、我々の計算では両者は一致した。 $J_2/J_1 > 0.5$ では基底状態にかなりの程度の縮退があることが確認された。WL 法で求めた基底状態の残留エントロピーの J_2/J_1 依存性を図 3 に示しておく。

図 4: 基底状態の 1 スピン当たりの残留エントロピーの J_2/J_1 に対するプロット

異なる基底状態のスピン配置を見ると、パターンとしては同じであるが、相互の“距離”は大きいことが分かる。パラメタ領域 $J_2/J_1 > 0.5$ はさらに $J_2/J_1 = 1$ を境界として定性的に異なる 2 つの領域に分けることができる。それぞれの領域内では基底状態（のスピン配置）は J_2/J_1 の値によらず共通である。そこで、領域 $J_2/J_1 < 0.5$ および $J_2/J_1 > 0.5$ における基底状態の集合をそれぞれ G_1 , G_2 として区別することにする。

$N = 178$ の場合について、 G_1 に属する基底状態の静的構造因子 $S(\mathbf{Q})$ を計算した結果、ブラッグスポットらしき構造が見られた。しかしながら、系のサイズを $N = 1220$ に増加させたときにその強度が減少したので長距離秩序と結論することはできなかった。実際、 $N = 178, 466$ の場合に反周期的境界条件を課して WL 法を行っても、状態密度の形に目で分かる変化は見られなかった。他方、 G_2 に属する基底状態の $S(\mathbf{Q})$ は明白に散漫散乱となっていた。このパラメータ領域で

は、 J_2 による5角形を基調とした反強磁性的相互作用が強く、反強磁性的3角格子イジングスピンのような振る舞いをすることが予想される。

5 考察

Reを含む磁性準結晶に対する実験では、ランダムスピン系で見られる所謂 canonical spin glassとは違った緩和現象に基づく振る舞いが見出されている⁶⁾。同様なことはカゴメ格子やパイクロア格子などの周期格子上のフラストレイトしたスピン系でも見出されているようである。本研究では、準結晶上のスピン系が、3角格子ほどはトリビアルでない縮退をして凍結することを明らかにした。これが磁性準結晶に対する実験を説明しているかどうかを確認することは今後の課題である。

謝辞

モンテカルロ法についての多角的なご教示と Wang-Landau 法のプログラミングコードの提供について岡部豊先生に深く感謝致します。また、ディスカッションに付き合ってくださいました坂井徹先生、松本宗久助手にも改めて感謝したいと思います。

参考文献

- 1) Y. Okabe, K. Niizeki, J. Phys. Soc. Japan, **57**(1988), 16
- 2) Matsuo S, Ishimasa T, Nakano H, J. Magn. Magn. Mater., **246**(2002), 223
- 3) T. J. Sato, J. Guo, and A. P. Tsai, J. Phys.: Cond. Mat. **13**(2001), L105
- 4) J. Lee, PRL, **71**(1993), 211
- 5) F. Wang, D. P. Landau, PRL, **86**(2001), 2050
- 6) J. Dolinšek, Z. Jagličić, T J Sato, J Q Guo and A P Tsa, J. Phys.: Cond. Mat, **15**(2003), 7981